



TITLE:

Energy Spectrum of Lattices with Defects(Abstract_要旨)

AUTHOR(S):

Takeno, Shozo

CITATION:

Takeno, Shozo. Energy Spectrum of Lattices with Defects. 京都大学, 1962, 理学博士

ISSUE DATE:

1962-06-19

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/210937>

RIGHT:

【 15 】

氏 名	武 野 正 三
	たけ の しょう そう
学 位 の 種 類	理 学 博 士
学 位 記 番 号	理 博 第 5 1 号
学位授与の日付	昭 和 37 年 6 月 19 日
学位授与の要件	学 位 規 則 第 5 条 第 1 項 該 当
研究科・専 攻	理 学 研 究 科 物 理 学 専 攻
学 位 論 文 題 目	Energy Spectrum of Lattices with Defects (欠陥を持つ格子のエネルギー・スペクトル)
論文調査委員	(主 査) 教 授 富 田 和 久 教 授 田 中 憲 三 教 授 内 田 洋 一

論 文 内 容 の 要 旨

凝縮相を取り扱う理論の中では格子構造をもつ固体の理論がはやく進歩した。これは完全な格子のもつ translational symmetry を考慮に入れることによって取り扱いが大いに簡単化され、巨視的な資料に含まれる巨大な数の構成要素を扱う代りに、繰り返し構造の単位となる unit cell に着目してこれを論ずることができるからである。しかし、実際の固体は必ずしも完全な結晶でなく、一般にはその中に欠陥を含んでいる。このような欠陥もしくは不純物の存在が固体全体の性質にどのような影響を与えるかということとは今日の物理学における大きい問題であり、欠陥もしくは不純物を含む固体の応用面における重要性は人の認めるところである。

欠陥を含む格子の性質が定量的に論ぜられるようになったのは最近のことであり、その理論は未だ完成の域に達しているとはいいい難い。代表的な問題としては欠陥の存在が格子振動に及ぼす影響および格子内における電子の運動に及ぼす影響の二つが考えられるが、両者の理論的取り扱いは従来場合場合に依じて考えられてきた。また定量的な取り扱いの行われてきたものは主として一次元の問題に限られ、多次元の問題は未解決というのが実情である。

主論文における著者の意図の第1は、上記二種の問題のいずれにも適用可能な一般的取り扱いを目ざすことであり、その目的をもって Green 函数の方法を採用し、一般論を述べたものが主論文第1部である。この方法によれば振動数スペクトルまたは状態密度は Green 函数または密度行列の trace を計算することによって得られ、具体的な表示や波動函数の知識を要しないという利点がある。

第1部においては不純物を含む格子の密度行列を扱い基礎方程式の形式的解を一般的に導いた上、スペクトルの能率 (moment) を高次まで計算することを試みており、さらに能率の方法と、random walk の問題との関連に注意している。

主論文第2部においては問題を格子振動スペクトルに極限し、種々の場合について欠陥の存在の影響を実際に評価している。第1部における能率の方法は高次まで計算はできるが、node の多いスペクトルを

再構成する場合には収斂がおそい事実を考慮し、第2部においては摂動展開法を採用し、計算可能な diagram をできるだけ集める方法を用いた。この論文において取り扱っている不純物は同位元素によっていくつかの格子点を置きかえた場合に限り、その種類は1種類であるとする。また次元数は限られていない。

前半においては不純物は少数で、位置が指定されている場合を扱い、母体の原子に比べて軽い不純物がいった場合に禁止帯中に δ 函数型の局在振動スペクトルがあらわれることを示し、また許容帯中の準位もずれることを示している。母体の原子に比べて不純物のほうが重い場合には許容帯内の準位がずれるだけで局在振動はあらわれないことが示される。

後半においては不純物の位置が全く random である場合を取り扱い振動数スペクトル $G(\omega^2)$ の端を求めて、これに定性的考察を附加しており、次の結果が示される。

(1) 許容帯の下端はあまり移動せず形も変らない。ただし、下端附近における状態密度は軽い不純物の場合には減少し、重い不純物の場合には増加する。

(2) 許容帯の上端附近は特に軽い不純物の場合高振動数側にはり出す傾向をもち、準位の減衰を省略することができない。

(3) 不純物がある程度以上軽い場合には許容帯とは別に離れて、高振動数の側に“不純物帯”というべき band があらわれる。

(4) 一般に、不純物が重い場合には準位のずれのみが重要で準位の減衰はこれを無視することができるが、不純物が軽い場合には、両者を考えに入れなければ十分な結論を導くことができない。

以上後半部における取り扱いはやや定性的であるが、その結論が一次元的模型に限られず、三次元の場合をも含めて導かれている点が注目される。

参 考 論 文

その1 強磁性共鳴吸収において観測される吸収線の幅が本質的な減衰によるものでなく、反磁場が場所によって一様でないことから生ずる共鳴周波数の分布によって生ずる可能性があることを指摘したレターである。

その2 主論文第2部において扱われた不純物をふくむ格子の振動を主題とするが、この論文の意図は一次元のくさりにおける局在振動を時間的に追跡し、その振幅が漸近的に有限であることを示したものである。

その3 主論文第1部において展開した一般論を、欠陥をもつ格子内における電子の運動に適用したものである。

格子振動の場合と種々の意味で並行した定性的結論がえられるが、定量的結果の発表は将来の問題とされている。

論 文 審 査 の 結 果 の 要 旨

固体内の欠陥が、母体の性質にどのような変化を与え、また特別の性質を新たに生ずるかということは応用的側面から考えても今日の重要な問題であるが、この種の問題に対する一般的基礎的理論はその数が多くない。著者の主論文はこの意味において大きな役割を果たすものと考えられる。その理由は種々ある

が、次の諸点を考えることができる。

(1) 従来格子振動の問題と、電子の運動の問題とは、それぞれの場面において別個に取り扱われてきたのに対して、著者は Green 函数法を採用することにより両者を統一的に取り扱ったこと。これは単に既知の事実を整理したという段階に止まらず、両者の形式的類似性と実質的相違とを区別するために大きな意味があると考えられる。

(2) 従来の理論が、計算上の便宜のために多く一次元模型に限定されていたのに対し、定性的部分を含むとはいえ三次元の問題をも一般的に論じたこと。これは著者の学問的勇気のあらわれであり、事実きわめて長時間の労力を投じて、重要な結論がいくつか導かれている。

(3) 参考論文において取り上げている電子に関する問題は未発表であるが、不純物帯の理論として、母体の band の存在を取り扱いに入れた点は従来の理論より一步出ていること。

参考論文においては、著者が主題目および関連分野における多くの知見の所有者であることが認められる。

よって、著者の本論文は理学博士の学位論文として価値あるものと認める。